



COPIL n°5 chaire BIGMECA, 15 avril 2021 ■■

■ Mécanique des matériaux et des procédés de fabrication via l'apprentissage statistique

Henry Proudhon, David Ryckelynck

MINES ParisTech, université PSL, Centre des Matériaux, Evry



SAFRAN

Ordre du jour

09h00 Connexion à la reunion

09h10 Dernières nouvelles de la chaire BIGMECA (Henry Proudhon)

09h40 Rewriting the DCT pre-processing pipeline (Joao Bertoldo)

10h00 4D experiments and simulations (Clement Ribart)

10h25 Plateforme de donnees BIGMECA (Aldo Marano)

11h00 DMS Kenza Zougagh

11h20 DMS Daria Mesbah

11h40 discussion (futurs sujets mastères DMS)

12h00 fin de la reunion

Ordre du jour

- 1 Études en cours
- 2 Enseignement
- 3 Dissémination

Plan

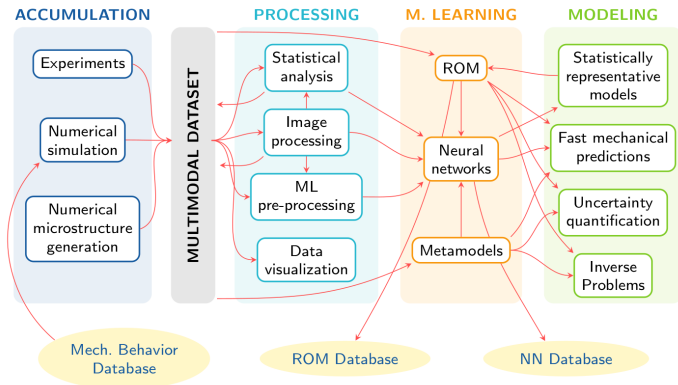
1 Études en cours

2 Enseignement

- Enseignement IC MINES ParisTech
- Semaine de cours CVML février 2021

3 Dissémination

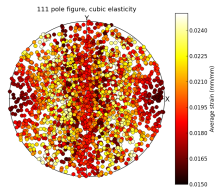
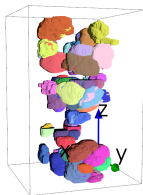
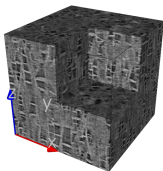
Rapport et premiers développements de la plateforme de données BIGMECA (travaux Aldo Marano)



- Bibliographic report, first release in November 2020
- Applications : image based modelling, uncertainty propagation, digital twins for predictive maintenance
- GENCI project on *Massive uncertainty propagation in crystal plasticity for 4D mechanical testing analysis*

PYMICRO The pymicro library

The goal of pymicro is to make it easy (or easier) to process your 3D datasets especially when it comes to automated processing needed for in situ data analysis.

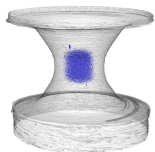


- Open source python library developed at Centre des Matériaux : <http://github.com/heprom/pymicro>
- Package available from pypi and conda
- Continuous development on github

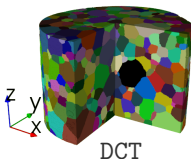
Pymicro is an open-source Python package to work with material microstructures and 3d data sets.

docs passing build passing License MIT

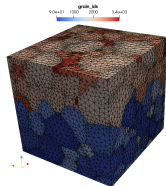
Pymicro as a toolbox



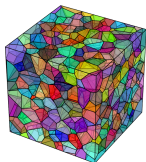
tomography



DCT



segmentation, meshing
(F. N'Guyen)



neper

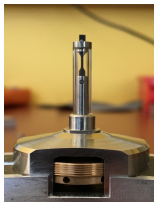


FFT simulations

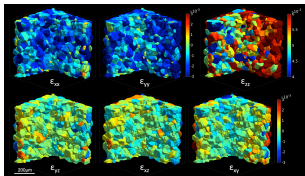


FE simulations

Application : identification of elastic constants from DCT/3DXRD strain maps [Reischig et al, in preparation]



- material : Gum Metal (Ti-36Nb-2Ta-3Zr-0.30 wt%)
- 0.6 mm thick specimen, 1500 grains
- Nanox device on ID11 beamline (ESRF)
- 2 load levels : 33 and 365 MPa



$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & sym & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & 0 & c_{44} & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{23} \\ 2\epsilon_{12} \\ 2\epsilon_{13} \end{bmatrix}$$

stiffness matrix ?

- 100+ grains in cross-section → isotropic approximation
- good strain device → zero or known shear
- scanning at min. 2 load steps
- fixed cross-section

hypothesis : volume average stress = the isotropic case :

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{V} \sum \sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{iso}$$

Isotropic approximation

$$\bar{\sigma} = \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{xx} \\ \bar{\sigma}_{yy} \\ \bar{\sigma}_{zz} \\ \bar{\sigma}_{yz} \\ \bar{\sigma}_{xz} \\ \bar{\sigma}_{xy} \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ F/S_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \nabla_{C_{IJ}} \bar{\sigma} \begin{bmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ C_{44} \end{bmatrix} \quad (6 \text{ equations})$$

From the 6 equations it is possible to find :

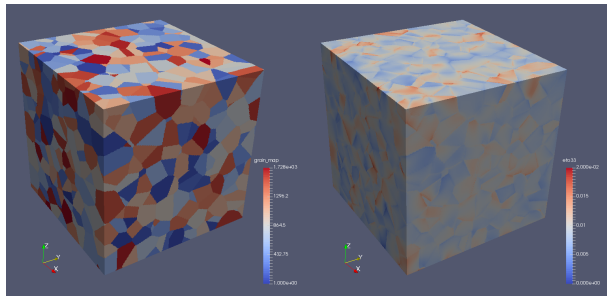
- 1 cubic lattice : 3 elastic moduli
- 1 hexagonal lattice : 5 elastic moduli
- 2 cubic lattices : 6 = 2 × 3 elastic moduli

Results	Nb	Ta	Zr	O	C_{11}	C_{12}	C_{44}	A
This study	36	2	3	0.3	124.4	88.9	29.9	1.68
Talling et al. [2008]	35.7	2.1	3.2	0.42	125	90	31	1.77

Use of pymicro to generate massive data sets

To verify the method, pymicro was used to generate **virtual experiments** (microstructure + strain fields) :

- **6 materials** tested (gum metal, α -Ti, β -Ti, Ni, Cu, Nb)
- **217 microstructures** generated using neper from 8 to 5000 grains
- Amitex was used to simulate the full field response to uniaxial tension (**1302 simulations**)
- All results were automatically processed to a **single h5** file



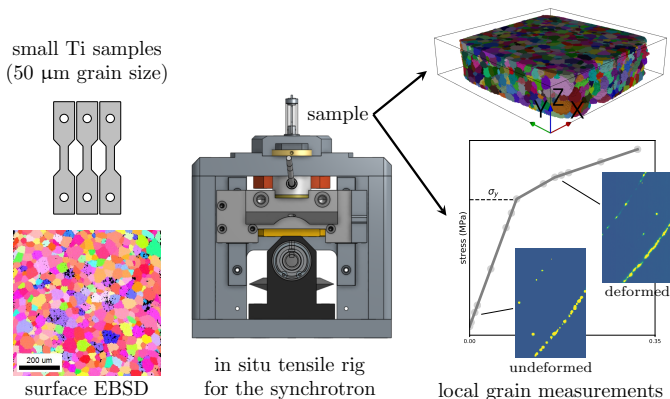
Result for α -Ti

	True	fit
C_{11}	162.0	163.0
C_{12}	92.0	88.0
C_{13}	69.0	71.8
C_{33}	180.0	174.7
C_{44}	46.7	45.7

Statistical 4D tomography of polycrystalline materials

PhD thesis Clément Ribart 2019-2022

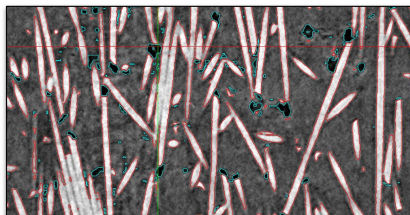
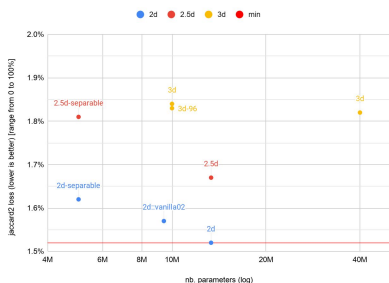
- develop **4D tomography** at the Psiché beamline (SOLEIL)
- automation of the chain in situ 4D → **simulation** at the scale of the microstructure ($10^4 - 10^5$ grains)
- leverage **machine learning** analysis of deformation and failure mechanisms.



Automated tomographic segmentation using CNN

Work of Joao Bertoldo, collaboration with E. Decencière CMM

validation loss vs. nb. parameters



red: fiber

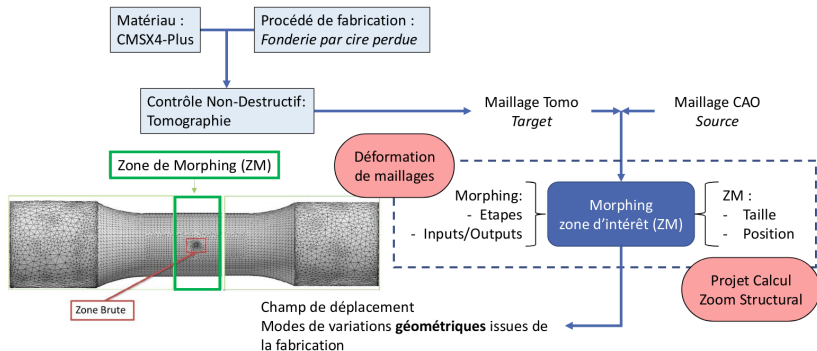
blue: porosity

- U-net-based architecture
- Different convolution types tested
- 2D convolutions yield lower losses on unseen data
- Image \rightarrow segmentation mapping overall well learned in general
- Model convergence \sim 5 hours
- Using separable convolutions reduces 60% of parameters at a low performance cost
- Results are comparable to human segmentation precision

DMS project of Daria Mesbah

Achieving life predictions in monocrystalline superalloys via digital twins

Characterize morphological variations of fundry parts from tomographic images

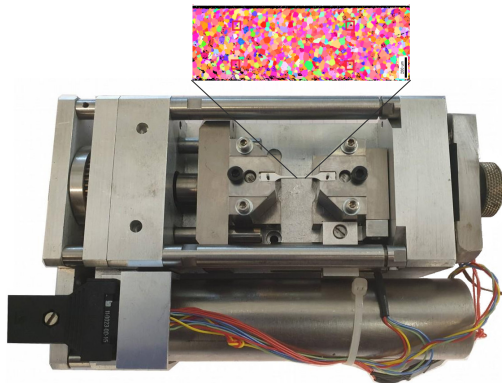


Advising team

D. Ryckelynck & A. Aublet (CDM), C. Remacha & R. Cariou (Safran)

Projet DMS de Kenza Zougagh

Identification of crystal plasticity constitutive behaviour using local characterization methods



SEM in situ tension
at Centre des Matériaux



Nano-indentation
at SafranTech

Advising team

H. Proudhon & C. Ribart (CDM), S. Gourdin & F. Coudon (Safran)

Plan

1 Études en cours

2 Enseignement

- Enseignement IC MINES ParisTech
- Semaine de cours CVML février 2021

3 Dissémination

Enseignement IC MINES ParisTech

Trimestre Recherche DIMA (David Ryckelynck, Etienne Decencière)

- 15 élèves dans le TR DIMA (Données, Modèles, Images et Apprentissage)
- 2 élèves accueillis au labo de début mars à fin avril
 - **Yasser Ghellab**, Automated segmentation of X-ray Computed Tomography using Convolutional Neural Network
 - **Arnaud Mondon**, Manifold learning in mechanics of defects
- séminaire de présentation fin avril + rédaction d'un rapport sous forme d'article

Enseignement IC MINES ParisTech

Trimestre Recherche DIMA (David Ryckelynck, Etienne Decencière)

- 15 élèves dans le TR DIMA (Données, Modèles, Images et Apprentissage)
- 2 élèves accueillis au labo de début mars à fin avril
 - **Yasser Ghellab**, Automated segmentation of X-ray Computed Tomography using Convolutional Neural Network
 - **Arnaud Mondon**, Manifold learning in mechanics of defects
- séminaire de présentation fin avril + rédaction d'un rapport sous forme d'article

Option IDSC MINES ParisTech

- Nous allons accueillir un élève de l'ENS Paris Saclay et 3 élèves de l'X.
- La présentation de l'option sera faite le 21 avril.
- L'option est maintenant limitée aux élèves de 3A suite à la refonte pédagogique de l'Ecole.
- Nous prévoyons des visites de sites industriels ou de recherche en janvier 2022.

Computer vision and machine learning for the material scientist (CVML)

Mastère DMS, bloc B3

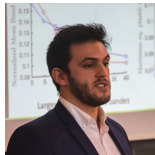
February 22-26, 2021

Henry Proudhon, Pierre Kerfriden, Aldo Marano,
Joao Casagrande Bertoldo, Bruno Figliuzzi

*MINES ParisTech, PSL Research University
Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, Evry, France*



Équipe pédagogique



Henry Proudhon Directeur de Recherches CNRS, Centre des Matériaux

Pierre Kerfriden Professeur assistant, Centre des Matériaux

Aldo Marano Postdoc chaire BIGMECA

Joao P. C. Bertoldo stagiaire Mines ParisTech, chaire BIGMECA

Bruno Figliuzzi Maître de Recherches, Centre de Morphologie Mathématiques

Spécificités 2020-2021

- Cette année le cours a été dispensé en **mode hybride** sur Zoom avec en moyenne 60 participants!
- **Notes de cours** disponibles sur <https://bigmeca.minesparis.psl.eu/cvml-2021>
- Tutoriels sous **Google colab**
- **Channel Slack** pour poser des questions/poster du code durant les TPs.
- **Examen écrit** pour les mastères DMS en fin de semaine.
- Questionnaire de satisfaction à la fin : **85% satisfaits** ou très satisfaits (47 réponses)



Résumé

Le cours propose une large introduction à la **vision par ordinateur** et au **machine learning**. Nous traiterons principalement de modèles supervisés pour les problèmes de **classification** et de **regression**. Les techniques de méta-modèles seront également abordées. Une large partie de la semaine sera consacrée aux techniques de réseaux de neurones (apprentissage profond et réseaux de convolutions).

Tous les cours feront l'objet de séances de **travaux pratiques** avec le langage Python sous jupyter ou Google colab.



CVML : February 2021 schedule

Monday	Tuesday	Wednesday	Thursday	Friday
Introduction to computer vision (HP)	Machine learning 2 (HP)	Meta model 2 (PK)	Deep learning (HP)	CNN for Semantic segmentation (JCB)
Tutorial classification k-NN (HP, AM)	Tutorial machine learning 2 (HP, AM)	Tutorial meta model 2 (PK, AM)	Tutorial deep learning (HP, AM)	Tutorial CNN 2 (BF)
Machine learning 1 (HP)	Meta Model 1 (PK)	Introduction to neural networks (HP)	Convolutional neural nets (HP)	Yolo : real time object detection (BF)
Tutorial machine learning 1 (HP, AM)	Tutorial meta model 1 (PK, AM)	Tutorial neural networks (HP, AM)	Tutorial CNN 1 (HP, AM)	Written exam

Equipe pédagogique 2021 Henry Proudhon, Aldo Marano, Pierre Kerfriden, Bruno Figliuzzi, Joao Casagrande Bertoldo.

Travaux pratiques avec Python sous Google colab.

Plan

1 Études en cours

2 Enseignement

- Enseignement IC MINES ParisTech
- Semaine de cours CVML février 2021

3 Dissémination

Conférences / Séminaires 2021

Passées :

- 28 janvier 2021 H. Proudhon, GT Mecamat *Combining 3D experiments and crystal plasticity simulations with machine learning to predict short fatigue crack growth*
- 01 février 2021 H. Proudhon, 5th Annual Workshop on Advances in X-ray imaging *Advancement in the understanding of plasticity via in situ synchrotron methods*
- 04 février 2021 J. Bertoldo ISIS, workshop *Deep learning for automated segmentation of tomographic images*
- 06 avril 2021 C. Ribart, colloque plasticité *In situ multimodal experimental testing and simulations in volume for statistical analysis of crystal plasticity*
- 08 avril 2021 H. Proudhon, Séminaire I2M Ensam Bordeaux *Structural materials in 4 dimensions : the data challenge*

Conférences / Séminaires 2021

A venir :

- 11 mai 2021 J. Bertoldo ISIS, workshop *Challenges in image segmentation for ultra-fast diffraction contrast tomography*
- fin juin 2021 C. Ribart, 3DMS conference *Statistical Analysis of Crystal Plasticity on Commercially Pure Titanium by Coupling 4D Testing and Finite Element Simulations*
- septembre 2021 A. Marano, Complas 2021 *Microstructural uncertainty propagation in experimentally driven crystal plasticity simulations via model reduction and machine learning* + David Ryckelynck
- septembre 2021 D. Ryckelynck, Mechanistic Machine Learning and Digital Twins for Computational Science, Engineering & Technology *Transfer learning via Rom-nets in mechanical engineering*

Articles en cours de rédaction

deep learning J. Bertoldo et al., Nature Machine Intelligence *A modular U-Net for automated segmentation of X-ray tomography images in composite materials*

4D testing C. Ribart et al., J. synchrotron radiation *Advancement in the understanding of plasticity via in situ synchrotron methods*

data platform A. Marano et al., journal TBD *A new mechanics of material data platform*

elastic constants P. Reischig et al., journal TBD *Elastic constants estimation from 3D maps of complete elastic strain tensor fields obtained from DCT*